

МИНОБРНАУКИ РОССИИ

Федеральное государственное бюджетное образовательное учреждение
высшего образования
«САРАТОВСКИЙ НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ
ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ ИМЕНИ
Н.Г.ЧЕРНЫШЕВСКОГО»

Кафедра радиотехники и электродинамики
наименование кафедры

**Композитные структуры на основе одностенных углеродных нанотрубок и
подложек оксида кремния**

АВТОРЕФЕРАТ БАКАЛАВРСКОЙ РАБОТЫ

Студента 4 курса 4032 группы

направления 03.03.03 «Радиофизика»

код и наименование направления

института физики

наименование факультета

Петрунина Александра Алексеевича

фамилия, имя, отчество

Научный руководитель

профессор, д.ф.-м.н.

должность, уч. ст., уч. зв.

О.Е. Глухова

личная подпись, дата

О.Е. Глухова

инициалы, фамилия

Зав. кафедрой

профессор, д.ф.-м.н.

уч. ст., уч. зв.

О.Е. Глухова

личная подпись, дата

О.Е. Глухова

инициалы, фамилия

Саратов 2021 г.

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность бакалаврского исследования заключается в значимости для современного этапа развития физико-математических наук приращения знаний о наноматериалах. Современные условия развития научной мысли, промышленного сектора требуют формирования наиболее эффективных сценариев решения возникающих инженерных задач и производственных проблем. Развитие высокоточной и высокоэффективной электроники базируется на подобных исследованиях и требует их продолжения для обеспечения меняющихся со временем нужд человечества.

Объектом бакалаврского исследования является композитные структуры.

Предметом бакалаврского исследования являются композитные структуры на основе одностенных углеродных нанотрубок и подложек различных материалов.

Цель: изучение композитных структур на основе одностенных углеродных нанотрубок и подложек различных материалов

Задачи, решаемые в рамках поставленной цели:

1. Применение метода сильной связи на основе теории функционала плотности в приближении сильной связи;
2. Применение методов сопряженных градиентов для поиска равновесной конфигурации системы;
3. Осуществление расчета зонной структуры и проводимости;
4. Анализ структурных особенностей композитных структур;
5. Анализ электронной зонной структуры композитных структур;
6. Анализ функции пропускания композитных структур;
7. Изучить закономерности протекания тока в композитных структурах.

Научная новизна бакалаврской работы заключается в том, что установлена степень влияния подложек графена и оксида кремния на электрофизические свойства слоев одностенных углеродных нанотрубок:

1. Установлено, что симметрия кристалла SiO_2 оказывает значительное влияние на атомистическую конфигурацию и электрофизические свойства структур. В частности, оксид кремния с пространственной группой $R4_2/mnm$ взаимодействует со слоями УНТ в основном ван-дер-ваальсово. А оксид кремния с пространственной группой $R3_121$ вступает в связь со слоями УНТ, формируя ковалентные связи, что приводит к значительному изменению физических свойств;

2. Выявлено, что профиль функции плотности состояний (DOS) слоев УНТ на подложке имеет схожий характер изменения с DOS “чистых” слоев УНТ и отдельно DOS подложки;

3. Показано, что функции пропускания слоев УНТ претерпевает незначительные изменения при добавлении подложки графена. Однако подложки оксида кремния в зависимости от пространственной симметрии существенно меняет функцию пропускания, а вместе с тем сильно изменяется сопротивление исследуемой структуры;

Основные положения бакалаврского исследования, выносимые на защиту:

1. Симметрия кристалла SiO_2 оказывает значительное влияние на атомистическую конфигурацию и электрофизические свойства структур. И, в частности оксид кремния с пространственной группой $R4_2/mnm$ взаимодействует со слоями УНТ в основном ван-дер-ваальсово. А оксид кремния с пространственной группой $R3_121$ вступает в связь со слоями УНТ, формируя ковалентные связи, что приводит к значительному изменению физических свойств;

2. Профиль функции плотности состояний (DOS) слоев УНТ на подложке имеет схожий характер изменения с DOS “чистых” слоев УНТ и отдельно DOS подложки;

3. Функции пропускания слоев УНТ претерпевает незначительные изменения при добавлении подложки графена. Однако подложки оксида кремния в зависимости от пространственной симметрии существенно меняет функцию пропускания, а вместе с тем сильно изменяется сопротивление исследуемых структур;

Теоретическая значимость результатов бакалаврской работы обусловлена тем, что рассматриваемые в тексте проблемы способствуют приращению знаний в физико-математических науках. В частности, в квантовой радиофизике и механике, в физике твердого тела, молекулярной электронике и квантовой химии. Рассматриваемые в бакалаврской работе проблемы и полученные при их решении результаты могут быть применены при преподавании и освоении образовательных программ, охватывающих обозначенные направления исследования, а также при написании монографий и методических пособий.

Практическая значимость бакалаврской работы заключается в возможности применить различные аспекты исследования как базис для дальнейших научных разработок в области квантовой радиофизике и механике, в физике твердого тела, молекулярной электронике и квантовой химии.

Результаты исследования могут быть применены на практике при синтезе композитных структур на основе одностенных углеродных нанотрубок и подложек различных материалов. В дальнейшем на их основе возможно производство высокоточной и высокопроизводительной наноэлектроники.

Структурно бакалаврской работы состоит из введения, двух глав, семи параграфов, заключения и списка литературы.

КРАТКОЕ СОДЕРЖАНИЕ РАБОТЫ

В главе 1 рассказывается о применяемых методах в исследовании наноструктур. В частности, для энергетической оптимизации структур применялся метод сильной связи. После последовательного применения ряда приближений удастся получить выражения для полной энергии системы.

Выражение для полной энергии спин-поляризованного функционала плотности сильной связи (SDFTB) записывается в следующем виде

$$E_{tot}^{SDFTB} = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} \sum_i^{occ} n_{i\sigma} \{ \langle \psi_{i\sigma} | \hat{H}_0[n_0] | \psi_{i\sigma} \rangle \} + \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta} \gamma_{\alpha\beta} \Delta q_{\alpha} \Delta q_{\beta} \\ + \frac{1}{2} \sum_{\alpha}^N \sum_{l \in \alpha} \sum_{l' \in \alpha} p_{\alpha l} p_{\alpha l'} W_{\alpha ll'} + E_{rep}$$

где c_{μ}^i и c_{ν}^i – весовые коэффициенты при разложении по атомным орбиталям, Δq_{α} и Δq_{β} – флуктуации заряда на атомах α и β , соответственно, $\gamma_{\alpha\beta}$ – функция, экспоненциально убывающая с ростом расстояния между атомами α и β , E_{rep} – терм, описывающий отталкивательное взаимодействие на малых расстояниях.

При изучении электрических свойств решалась задача отыскания уровня Ферми по следующей формуле.

$$N_e = 2 \int_{E_1}^{E_2} DOS(E) f(E, E_F) dE$$

Значение E_F в формуле определялось таким образом, что число N_e было равно полному числу электронов в рассматриваемой системе, $DOS(E)$ – плотность электронных состояний (density of states), $f(E, E_F)$ – функция Ферми-Дирака. Пределами интеграла в формуле являются границы диапазона энергий разрешенных состояний.

Расчет функции плотности состояний и уровня Ферми проводился в программном обеспечении Mizar [4].

Описанный метод, хоть и допускает погрешность, зарекомендовал себя в построении зонной модели наноразмерных структур [4]. Зная значение уровня Ферми, становится возможным расчет функции пропускания.

Проводимость материала при этом можно найти с помощью следующих формул:

$$G = \frac{I}{V} = \frac{e^2}{h} \int_{-\infty}^{\infty} T(E) F_T(E - \mu) dE$$

$$F_T = \frac{1}{4k_B T} \operatorname{sech}^2 \left(\frac{E}{2k_B T} \right)$$

$$T(E) = \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \operatorname{Tr} [\Gamma_s(E) G_C^A(E) \Gamma_D(E) G_C^R(E)]$$

где $T(E)$ – функция передачи проводящего канала; F_T – функция учета теплового уширения, $G_C^A(E), G_C^R(E)$ – матрицы Грина, описывающие контакт с электродами; $\Gamma_s(E), \Gamma_D(E)$ – матрицы уширения уровня для стока и истока [4].

В главе 2 представлены результаты проведенного исследования. В этой работе исследовались два типа нанослоев: монослой и бислой одностенных углеродных нанотрубок типа armchair с хиральностями трубок (4,4), (5,5), (6,6), (7,7). Для этого строились супер-ячейки (рис. 1) исследуемых структур в программном комплексе Kvazar [5]. Далее моно- и бислой ОУНТ помещались на подложку оксида кремния (рис. 2). При этом анализировались зависимость свойств наноструктур от расстояния между трубками. Для этого расчеты проводились при расстоянии между соседними трубками в $d = 0.34$ нм и $d = 0.4$ нм. Все расчеты проводились для комнатной температуры – $T = 300$ К.

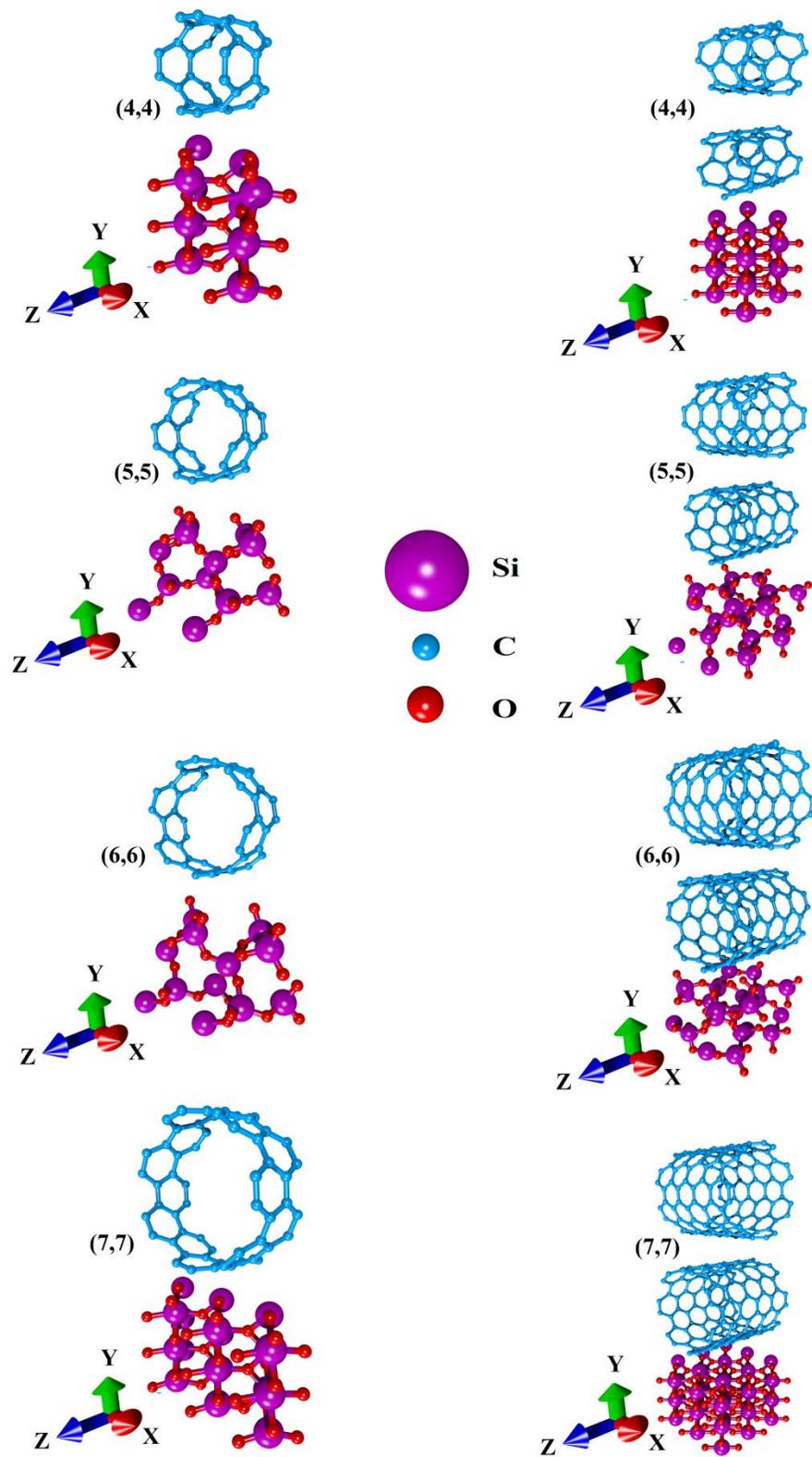


Рис. 1. Атомистические модели моно- и бислоев одностенных углеродных нанотрубок на подложках оксида кремния

Для моделирования атомистических моделей слоев углеродных нанотрубок на подложке оксида кремния необходимо подобрать так топологии элементарных ячеек SiO_2 , чтобы совпадали трансляционные векторы «чистых» моно- и бислоев углеродных нанотрубок с векторами трансляции самих подложек. Такое условие реализуется для трубок (4,4) и (7,7) оксидом кремния с пространственной группой симметрии $P4_2/mnm$ (при индексах Миллера (100)), а для трубок (5,5) и (6,6) подложкой $P3_121$ (с индексами Миллера (110))

Использование подложек $P4_2/mnm$ и $P3_121$ приводит к различию атомистических моделей слоев с трубками (4,4), (7,7) и слоев с трубками (5,5) и (6,6). Так углеродные нанотрубки сильно связаны с подложкой $P3_121$, что искажает форму углеродной нанотрубки и, соответственно, изменяет ее электрические свойства. Оксид кремния с пространственной симметрией $P4_2/mnm$ взаимодействует с нанотрубками исключительно силами Ван-дер-Ваальса

На рис. 2 представлены электронные зонные структуры для моно- и бислоев одностенных углеродных нанотрубок на подложках оксида кремния. Для большинства исследуемых структура уровень Ферми приходится на заполненные состояния, что свидетельствует о металлическом характере проводимости исследуемых структур. Такое поведение характерно для всех исследуемых нами наноструктур.

Как видно из рис. 2, профиль функции плотности состояний (DOS) для структур на подложках оксида кремния во многом определяется профилем DOS самих трубок, поскольку оксид кремния имеет широкую запрещенную зону на уровне Ферми. При этом стоит отметить, что бислоенная пленка на подложке имеет заметно большую интенсивность DOS, что связано с появлением дополнительных заполненных состояний от второй нанотрубки

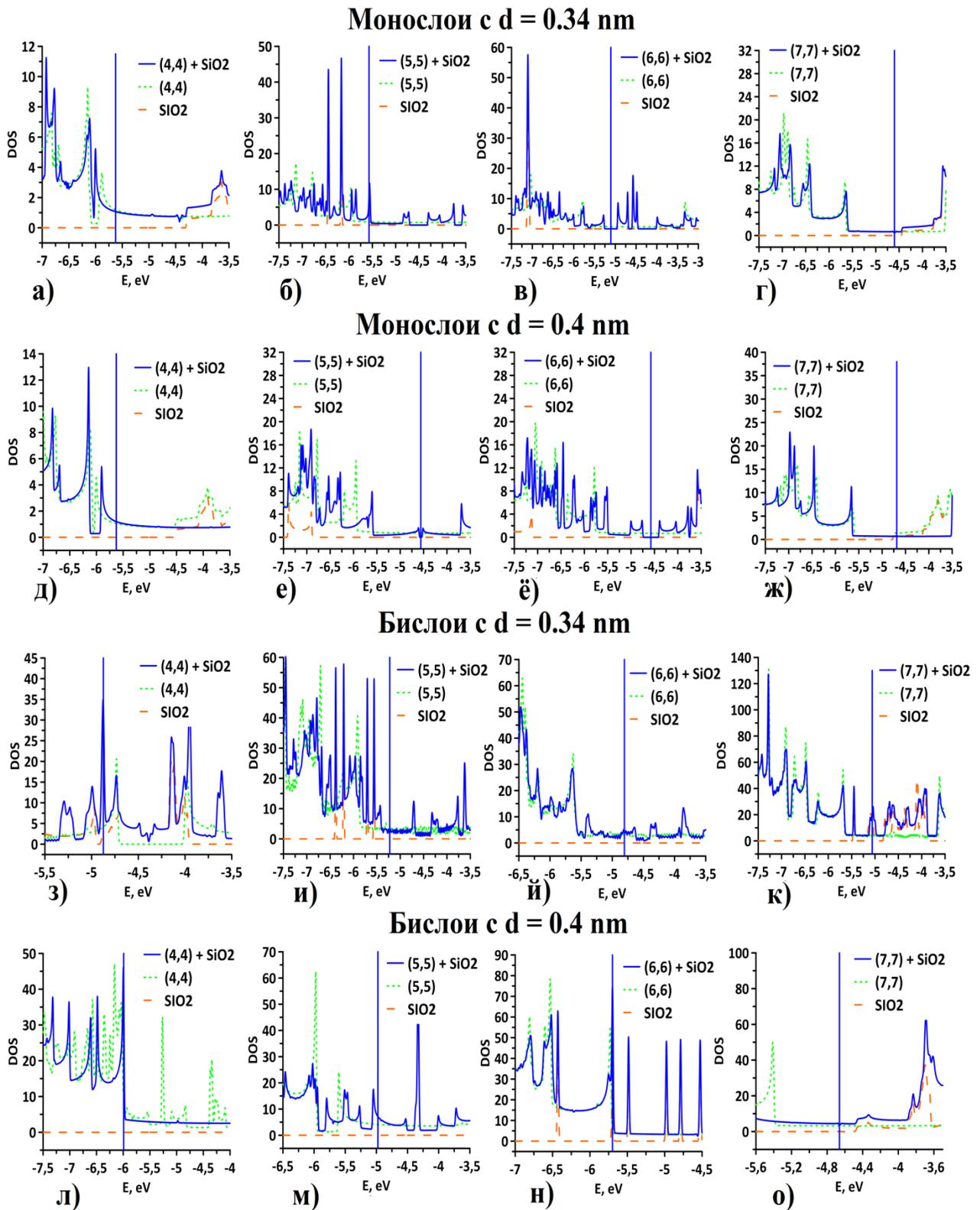


Рис. 2. Электронные зонные структуры моно- и бислой одностенных углеродных трубок на подложке оксида кремния. Вертикальная линия обозначает уровень Ферми

Из рисунков видно, что электронная зонная структура для слоев с трубками (5,5) и (6,6) на подложке оксида кремния имеет значительно больше пиков функции плотности состояний, которые при этом сопровождаются пиками самой подложки. Объяснить природа таких “всплесков” функции плотности состояний объясняется перетеканием заряда при взаимодействии подложки и нанотрубки (рис. 1).

После получения уровня Ферми для всех построенных моделей проводился расчет функции пропускания и электропроводность этих структур.

Было показано, что токоперенос в бислойных пленках (5,5) ощутимо отличается в зависимости от направления. Так в случае направления Z функция пропускания, как и в случае монослоев на основе трубок (5,5), значительно уменьшается, поскольку ток идет по трубке связанной ковалентной связью с подложкой. При этом для направления X, то есть при протекании тока по трубке, не связанной с подложкой, функция пропускания принимает практически постоянное значение.

В работе было показано, что бислойные пленки из трубок типа кресло являются высоко проводящими. Подобные пленки обеспечивают высокую проводимость в двух взаимно перпендикулярных направлениях. Сопротивление в обоих направлениях не превышает 34 к Ω для пленок на основе ОУНТ (4,4) и 7.5 к Ω для пленок на основе ОУНТ (7,7). Электрическое сопротивление меняется при изменении межтрубного расстояния и это изменение не одинаково для трубок разного диаметра. Для слоев с трубками (5,5) проводимость несколько ниже при токопереносе в направлении Z, то есть при протекании тока по нижней трубке, которая ближе к подложке, часть заряда “оттягивается” атомами кислорода с подложки оксида кремния. При протекании же тока в направлении X электроны практически беспрепятственно двигаются по наноструктуре. При этом проводимость слабо зависит от расстояния между трубками с подобной хиральностью.

ЗАКЛЮЧЕНИЕ

В бакалаврской работе было проведено исследование композитных структур на основе одностенных углеродных нанотрубок и подложек различных материалов. Для решения поставленной в работе цели был сформулирован ряд задач.

При решении задачи по применению метода сильной связи на основе теории функционала плотности в приближении сильной связи была проведена оптимизация геометрических структур по энергии.

При решении задачи по применению методов сопряженных градиентов для поиска равновесной конфигурации системы было получены атомистические модели исследуемых структур для оптимальной энергии рассчитанной с помощью теории функционала плотности в приближении сильной связи.

При решении задачи по осуществлению расчета зонной структуры и проводимости были получены электронные зонные структуры каждого наноматериала, функции пропускания, по которым проводился расчет проводимости и сопротивления

При решении задачи анализа структурных особенностей композитных структур в работе выявлены закономерности формирования атомистической структуры после проведения оптимизации методом сильной связи.

При решении задачи анализа электронной зонной структуры композитных структур были выявлены закономерности изменения электронных зонных структур при изменении их геометрических параметров и добавлении подложек графена и оксида кремния. Также был определен характер проводимости исследуемых структур.

При решении задачи анализа функции пропускания композитных структур был выявлен характер изменения функции пропускания для различных конфигураций атомистической модели.

При решении задачи по изучению закономерности протекания тока в композитных структурах было проанализировано изменение сопротивления и проводимости исследуемых структур при изменении их геометрических параметров и добавлении подложек графена и оксида кремния.

В ходе бакалаврской работы были получены следующие результаты:

1. Установлено, что симметрия кристалла SiO_2 оказывает значительное влияние на атомистическую конфигурацию и электрофизические свойства структур. В частности, оксид кремния с пространственной группой $P4_2/mnm$ взаимодействует со слоями УНТ в основном ван-дер-ваальсово. А оксид кремния с пространственной группой $P3_121$ вступает в связь со слоями УНТ, формируя ковалентные связи, что приводит к значительному изменению физических свойств;

2. Выявлено, что профиль функции плотности состояний (DOS) слоев УНТ на подложке имеет схожий характер изменения с DOS “чистых” слоев УНТ и отдельно DOS подложки;

3. Показано, что функции пропускания слоев УНТ претерпевает незначительные изменения при добавлении подложки графена. Однако подложки оксида кремния в зависимости от пространственной симметрии существенно меняет функцию пропускания, а вместе с тем сильно изменяется сопротивление исследуемой структуры;

Таким образом, в бакалаврской работе было проведено исследование композитных структур на основе одностенных углеродных нанотрубок и подложек различных материалов. Перспективы дальнейшего исследования проблемы лежат в сфере расширения полученных результатов на углеродные нанотрубки типов zigzag и chiral и применения подложек других химических соединений.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Frauenheim, T., Seifert, G., Elstner, M., Niehaus, T., Köhler, C., Amkreutz, M., Sternberg, M., Hajnal, Z., Carlo, A. D., Suhai, S. Atomistic simulations of complex materials: ground-state and excited-state properties / T. Frauenheim, G. Seifert, M. Elstner, T. Niehaus, C. Köhler, M. Amkreutz, M. Sternberg, Z. Hajnal, A.D. Carlo, S. Suhai // Journal of Physics: Condensed Matter. – 2002. – Vol. 14, № 11. – P. 3015. – Сведения доступны также по Интернет: URL: <https://doi.org/10.1088/0953-8984/14/11/313> (дата обращения: 15.05.2021). – Загл. сэкрана. Яз. англ.
2. Датта, С. Квантовый транспорт: от атома к транзистору / С. Датта ; пер. Д. В. Хомицкого. – Ижевск : Институт компьютерных исследований, 2009. – 532 с.
3. Шунаев, В. В. Электронные свойства и энергетические параметры модифицированных графен-фуллереновых комплексов с позиции применения в нанoeлектронике : дис. ... кандидата физико-математических наук : 05.27.01 / В. В. Шунаев. – Саратов, 2016. – 139 с.
4. Glukhova, O. E., Shmygin, D. S. The electrical conductivity of CNT/graphene composites: a new method for accelerating transmission function calculations / O. E. Glukhova, S. D. Shmygin // Beilstein Journal of Nanotechnol. – 2018. – Vol. 9. – P. 1254-1262.
5. Open multiprocessor software package for molecular modelling "KVAZAR" [Электронный ресурс]: открытый много процессорный программный комплекс молекулярного моделирования. – URL: <http://nanokvazar.ru/> (дата обращения: 15.05.2021). – Загл. С экрана. Яз. рус.